Grado en Físicas

Métodos Numéricos

Tema 2. Interpolación y aproximación de funciones

Alejandro Medina

Curso 2016/17, Septiembre 2016

Esquema

Esquema

Introducción

Conceptos *'similares'* pero diferentes

1. Interpolación
2. Extrapolación
3. Aproximación de funciones
4. Ajuste de datos

Esquema

1. Introducción
2. Interpolación
   - Interpolación polinómica
   - Interpolación local
3. Aproximación de funciones
4. Ajuste de datos

Interpolación

Interpolación polinómica. Polinomios de Lagrange

$$P_n(x) = f_0\ell_0(x) + f_1\ell_1(x) + \cdots + f_n\ell_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i\ell_i(x)$$

donde los polinomios $\ell_i(x)$ deben verificar que: $\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$

$$\begin{aligned} \ell_i(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)} \\ &= \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} \end{aligned}$$

Ejemplo de los polinomios de Lagrange

Calcúlese el valor aproximado de f(0,14) dados los valores de $f(x)$ contenidos en la tabla adjunta:

i	0	1	2	3
x_i	0	0,1	0,3	0,6
$f(x_i)$	1,00000	1,10517	1,34986	1,82212

La función $f(x)$ es realmente e^x, lo que nos permitirá estimar la bondad de la aproximación.

Ejemplo de los polinomios de Lagrange

Primero se evalúa cada uno de los polinomios, $\ell_i(x)$, en el punto $x = 0,14$:

$$\ell_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)} \longrightarrow \ell_0(0{,}14) = -0,16356$$

$$\ell_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)} \longrightarrow \ell_1(0{,}14) = 1,03040$$

$$\dots \longrightarrow \ell_2(0{,}14) = 0,14311$$

$$\dots \longrightarrow \ell_3(0{,}14) = -0,00996.$$

Entonces,

$$\begin{aligned} f(0{,}14) &\simeq f_0\ell_0(0{,}14) + f_1\ell_1(0{,}14) + f_2\ell_2(0{,}14) + f_3\ell_3(0{,}14) = \\ &= (1{,}0000)(-0{,}16356) + (1{,}10517)(1{,}03040) + (1{,}34986)(0{,}14311) + \\ &+ (1{,}82212)(-0{,}00996) = \\ &= 1{,}150251. \end{aligned}$$

Valor correcto para $f(0{,}14)$ con 6 cifras, $e^{0,14} = 1{,}150274$.
La diferencia en el valor aproximado aparece en la quinta cifra significativa.

Interpolación polinómica. Polinomios de Newton

$$P_n(x) = P_{n-1}(x) + f[\overbrace{x_n, x_{n-1}, \dots x_0}^{n+1 \text{ puntos}}](x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}),$$

donde:

$$\begin{cases} P_{n-1}(x) \quad \text{es el polinomio que utiliza} \quad \{x_0, x_1, \dots x_{n-1}\} \\ f[x_n, x_{n-1}, \dots x_0] \equiv \dfrac{f[\overbrace{x_n, \dots x_1}^{n}] - f[\overbrace{x_{n-1}, \dots x_0}^{n}]}{x_n - x_0} \\ P_0(x) \equiv f_0; \quad f[x_i] \equiv f_i \end{cases}$$

Los números $f[x_n, x_{n-1}, \dots x_0]$ se denominan *diferencias divididas*.

Ejemplo. Polinomios de Newton

Consideremos un conjunto de 4 puntos y sus correspondientes imágenes:

$$\{x_0, x_1, x_2, x_3\} \quad ; \quad \{f_0, f_1, f_2, f_3\}$$

1. Tomamos primero sólo x_0.

$$P_0(x) = f_0$$

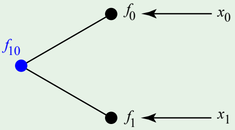
2. Consideramos ahora x_0 y x_1.

$$P_1(x) = P_0(x) + f[x_1, x_0](x - x_0)$$

$$\text{con} \quad f[x_1, x_0] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \equiv f_{10}$$

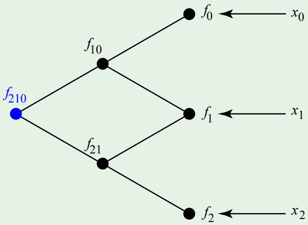
$$f[x_1] \equiv f_1 \; ; \quad f[x_0] \equiv f_0$$

Ejemplo. Polinomios de Newton



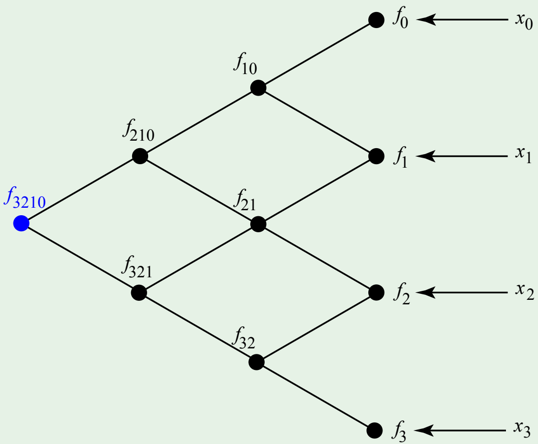
$$P_1(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) = \cdots = f_0\ell_0(x) + f_1\ell_1(x)$$

3. Con tres puntos $\{x_0, x_1, x_2\}$: $P_2(x) = P_1(x) + f[x_2, x_1, x_0](x - x_0)(x - x_1)$



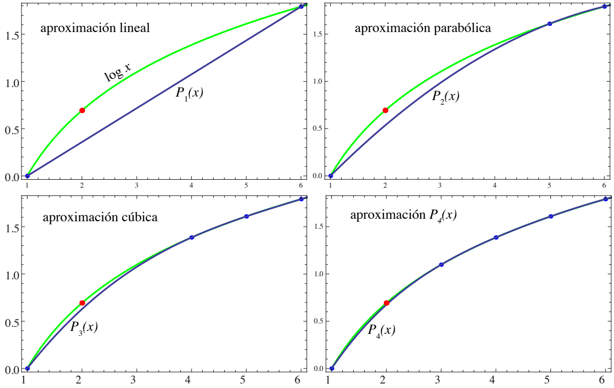
Ejemplo. Polinomios de Newton

4. Y para el caso de 4 puntos el esquema a seguir sería:



Polinomios de Newton. Ejemplo numérico

Estimación de $\log 2$ mediante una interpolación con el método de Newton.



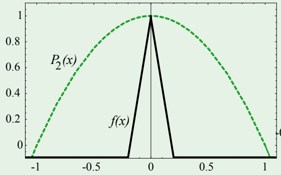
Error relativo respecto al valor exacto utilizando $P_4(x)$: $\Delta\varepsilon_4 = 2{,}6\,\%$

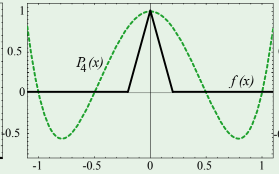
Ejemplo. Limitaciones de la interpolación polinómica

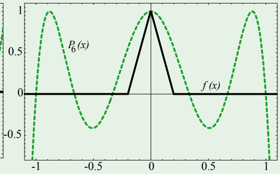
Se desea interpolar la función:

$$f(x) = \begin{cases} 0 & -1 \leq x \leq -0{,}2 \\ 5(0{,}2 - |x|) & -0{,}2 \leq x \leq 0{,}2 \\ 0 & 0{,}2 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Aproximaciones obtenidas con polinomios de grados 2, 4, y 6.

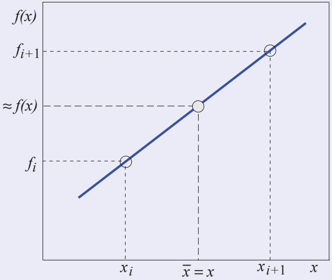






Interpolación local

Interpolación lineal entre dos puntos conocidos

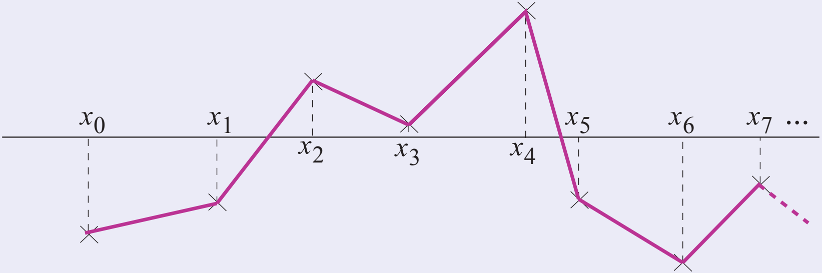


Es fácil encontrar la ecuación de una recta que pasa por esos dos puntos:

$$\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f(x) - f_i}{f_{i+1} - f_i} \quad \Longrightarrow \quad f(x) \simeq f_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f_{i+1} \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

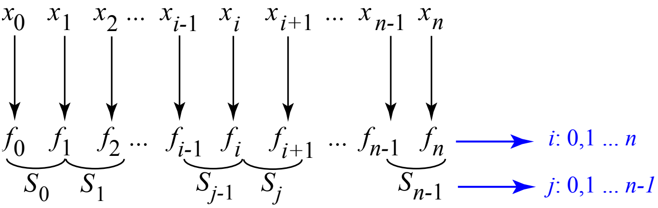
Interpolación local

Interpolación lineal por segmentos



Interpolación cúbica por segmentos

Por cada pareja $(x_i,\ x_{i+1})$ pasa un polinomio, $S_i(x)$, de grado 3. Esquemáticamente:



Hay n polinomios de grado 3, luego $4n$ coeficientes desconocidos $\Longrightarrow$ $4n$ incógnitas.

$$(1)(i=0,1,\ldots n-1)\quad \begin{cases} S_i(x_i)=f_i & \longrightarrow \quad n \text{ ecuaciones} \\ S_i(x_{i+1})=f_{i+1} & \longrightarrow \quad n \text{ ecuaciones} \end{cases}$$

$$(2)(i=1,2\ldots n-1)\ \begin{cases} S_i(x_i) &= S_{i-1}(x_i) \longrightarrow \text{contenida en } (1) \\ S_i'(x_i) &= S_{i-1}'(x_i) \longrightarrow n-1 \text{ ecuaciones} \\ S_i''(x_i) &= S_{i-1}''(x_i) \longrightarrow n-1 \text{ ecuaciones} \end{cases}$$

(faltan los extremos)

Interpolación cúbica por segmentos

(3) Para los extremos hay dos posibles condiciones de contorno:

A) *naturales* (extremo libre):

$$S_0''(x_0) = S_{n-1}''(x_n) = 0 \longrightarrow 2 \text{ ecuaciones}$$

Es decir, que en los extremos haya dos puntos de inflexión.

B) otras condiciones:

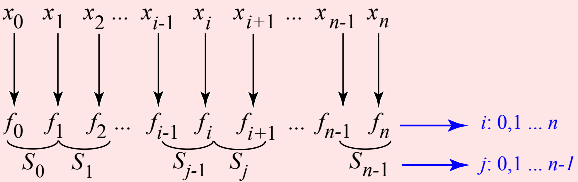
$$S_0'(x_0) = f_0' \, ; \quad S_{n-1}'(x_n) = f_n',$$

que deben ser datos $\longrightarrow$ 2 ecuaciones

Número total de ecuaciones:
$n + n + (n-1) + (n-1) + 2 = 4n$ ecuaciones.

Número total de incógnitas: $4n$ incógnitas.

Resumen splines (i)



$$S_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i \quad (i = 0, 1 \ldots n-1)$$

$$h_i \equiv x_{i+1} - x_i \tag{1}$$

$$\boxed{d_i = f_i} \tag{2}$$

$$\boxed{a_{i-1} = \frac{b_i - b_{i-1}}{3(x_i - x_{i-1})}} \tag{8}$$

Resumen splines (II)

$$\boxed{c_i = \frac{d_{i+1} - d_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{(b_{i+1} + 2b_i)}{3}(x_{i+1} - x_i)} \qquad (7)$$

$$\boxed{b_{i-1}h_{i-1} + 2\,b_i(h_i + h_{i-1}) + b_{i+1}h_i = \frac{3}{h_i}(d_{i+1} - d_i) - \frac{3}{h_{i-1}}(d_i - d_{i-1})}$$

Condiciones *naturales* de contorno:

$$b_0 = 0; \quad b_n = 0 \qquad (6)$$

Resumen splines (III)

Cambio de variables:

$$\begin{cases} u_i \equiv b_i \quad \text{(incógnitas)} \\ r_i \equiv \dfrac{3}{h_i}(d_{i+1} - d_i) - \dfrac{3}{h_{i-1}}(d_i - d_{i-1}) \\ A_i \equiv h_{i-1} \\ B_i \equiv 2(h_i + h_{i-1}) \\ C_i \equiv h_i \end{cases} \tag{3}$$

[Para todas estas variables, $i = 1, 2 \ldots n-1$, excepto para A_i: $(i = 2, 3 \ldots n-1)$ y para C_i: $(i = 1, 2 \ldots n-2)$].

Sistema de ecuaciones *tridiagonal*:

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & \\ & A_3 & B_3 & C_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & A_{n-2} & B_{n-2} & C_{n-2} \\ & & & & A_{n-1} & B_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \vdots \\ r_{n-2} \\ r_{n-1} \end{pmatrix}$$

Resumen splines (y iv)

Sustitución/eliminación gaussiana:

$$\begin{cases} B_1 & \longrightarrow B_1 \\ r_1 & \longrightarrow r_1 \end{cases}$$

$$(i = 2, 3 \dots n-1) \quad \begin{cases} B_i & \longrightarrow B_i - \dfrac{C_{i-1} A_i}{B_{i-1}} \\ r_i & \longrightarrow r_i - \dfrac{r_{i-1} A_i}{B_{i-1}} \end{cases} \tag{4}$$

$\Longrightarrow$ Solución del sistema:

$$\begin{cases} u_{n-1} & = \dfrac{r_{n-1}}{B_{n-1}} \\ u_i & = \dfrac{r_i - C_i u_{i+1}}{B_i} \quad (i = n-2, n-3 \dots 1) \end{cases} \tag{5}$$

Esquema

1. Introducción
2. Interpolación
3. Aproximación de funciones
   - Aproximación de Chebyshev
4. Ajuste de datos

Aproximación de funciones

Aproximación de Chebyshev. Polinomios de Chebyshev

$T_0(x) = 1$

$T_1(x) = x$

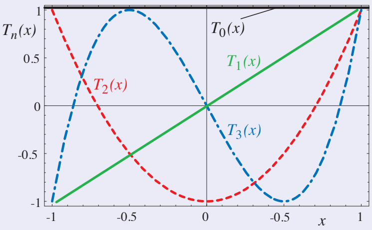
$T_2(x) = 2x^2 - 1$

$T_3(x) = 4x^3 - 3x$

$T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$

$\dots\dots\dots$

$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (n \geq 1)$



Implementación de la aproximación de Chebyshev (I)

paso 1.- Si se quiere evaluar una función, $F(z)$, en un intervalo $[a,b] \neq [-1,1]$ se efectúa un *cambio de variable*:

$$z \in [a,b] \qquad \text{se define} \qquad x = \frac{z-(b+a)/2}{(b-a)/2}$$

$$\Longrightarrow \quad x \in [-1,1]$$

y despejando z en función de x se tiene:

$$z(x) = \frac{1}{2}(b-a)x + \frac{1}{2}(b+a)$$

Llamando $f(x) = F(z(x))$, ya se le puede aplicar directamente la aproximación de Chebyshev.

Implementación de la aproximación de Chebyshev (II)

paso 2.- Se calculan los n coeficientes ($n < 30, 40$) para la aproximación de grado n. Para ello se utiliza:

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi}{n}(k - 1/2)\right)$$

$$T_{j-1}(x_k) = \cos\left(\frac{\pi}{n}(j-1)(k - 1/2)\right)$$

$$c_j = \frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)T_{j-1}(x_k) \quad \text{con} \quad f(x_k) = F(z(x_k))$$

Implementación de la aproximación de Chebyshev (y III)

paso 3.- Conocidos los c_j, se evalúa $F(\bar{z}) = f(\bar{x})$ a orden $m < n$ haciendo la suma:

$$F(\bar{z}) = f(\bar{x}) \simeq \sum_{k=1}^{m} c_k T_{k-1}(\bar{x}) - \frac{1}{2} c_1 \quad \text{donde} \quad \bar{x} = x(\bar{z})$$

Para calcular $T_{k-1}(\bar{x})$, se utiliza la relación de recurrencia:

$$T_{n+1}(x) = 2x T_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (n \geq 1)$$

siendo,

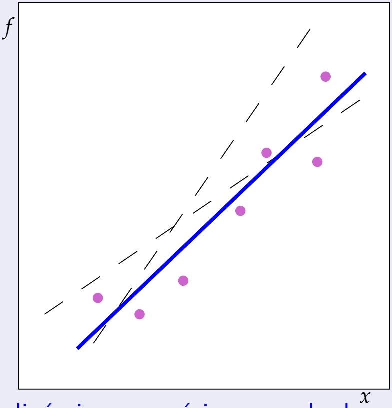
$$T_0(x) = 1 \quad \text{y} \quad T_1(x) = x.$$

Esquema

1. Introducción
2. Interpolación
3. Aproximación de funciones
4. Ajuste de datos

Ajuste de datos

1. Ajuste lineal por mínimos cuadrados



* Conjunto de datos
* Función modelo
* Función error

2. Ajuste polinómico por mínimos cuadrados

Ejercicios teóricos

1.- La ecuación:

$$x - 9^{-x} = 0$$

tiene una solución en el intervalo $[0, 1]$. Utilizando el polinomio interpolador de Lagrange sobre los puntos $x_0 = 0$, $x_1 = 0{,}5$, $x_2 = 1$, encuéntrese una solución aproximada en dicho intervalo.

2.- Una función $f(x)$ toma valores según la siguiente tabla:

i	0	1	2
x_i	-2	0	1
$f(x_i)$	0	1	-1

La ecuación $f(x) = 0$ tiene una solución en el intervalo $[0, 1]$. Encuéntrese una solución aproximada de la anterior ecuación haciendo uso del polinomio interpolador de Lagrange obtenido a partir de los puntos de la tabla.

Ejercicios teóricos

3.- La tabla adjunta representa la fuerza, $f(x)$, que experimentan dos átomos de Ar en función de la distancia, x, entre sus núcleos. Obténgase aproximadamente $f(1{,}5)$ haciendo uso de la construcción recursiva de los polinomios de Newton, $P_0(x)$, $P_1(x)$, $P_2(x)$ y $P_3(x)$, eligiendo adecuadamente los puntos a considerar.
Estímese la precisión obtenida en cada caso sabiendo que el valor exacto de la función es $f(1{,}5) = 0{,}5118277$.

x	$f(x)$
1,0	0,7651977
1,3	0,6200860
1,6	0,4554022
1,9	0,2818186
2,2	0,1103623

4.- Determínense los valores de a, b, c que hacen que la siguiente función sea un *spline* cúbico con nodos en los puntos $x_0 = 0$, $x_1 = 1$, $x_2 = 3$:

$$S(x) = \begin{cases} x^3 & \text{si} \quad x \in [0,1] \\ -\frac{1}{2}(x-1)^3 + a(x-1)^2 + b(x-1) + c & \text{si} \quad x \in [1,3] \end{cases}$$

¿ Tiene el spline obtenido condiciones de contorno naturales en los puntos $x_0 = 0$ y $x_2 = 3$?

Ejercicios teóricos

5.- Una función $f(x)$ toma valores según la siguiente tabla:

i	0	1	2
x_i	-1	0	1
$f(x_i)$	13	7	9

Haciendo uso de los puntos de la tabla, encuéntrese el *spline* cúbico $S(x)$ que aproxima a la función $f(x)$ en el intervalo $[-1, 1]$. Considérense condiciones de contorno *naturales*.

6.- Estímese el valor de $\log 10$ con cada uno de los procedimientos que se detallan a continuación. En cada caso calcúlese el error relativo comparando con el valor exacto. Utilícense 7 cifras significativas en todos los cálculos.
a) Interpolación lineal de Newton a partir de $\log 8$ y $\log 12$.
b) Interpolación lineal de Newton a partir de $\log 9$ y $\log 11$.
c) Interpolación de Newton a partir de $\log 8$, $\log 9$ y $\log 11$.
c) Interpolación de Newton a partir de $\log 8$, $\log 9$, $\log 11$ y $\log 12$.

Ejercicios teóricos

7.- La tabla adjunta representa un conjunto de datos medidos en el laboratorio para la evolución de la entropía específica del agua sobrecalentada a 200 MPa en función del volumen específico. Haciendo uso de los polinomios de Lagrange, obténgase la entropía cuando el volumen específico vale $v = 0{,}108$ m^3/kg.

v (m^3/kg)	0,10377	0,11144	0,12540
s [kJ/(kg K)]	6,4147	6,5453	6,7664